Heisenberg modelと相転移I

AUTHOR(S):

鈴木, 増雄

「Heisenberg model と相転移 I」

鈴 木 増 雄（東大理）

（5月28日受理）

§ 1. Introduction

二次の相転移の中で・スピン系の相転移は最も古くから研究されており、その出発点も、Heisenberg によって、明確な形に表わされている。それにもかかわらず、localized Spin の model として、最も realistic なこの Heisenberg model では、一次元でも、厳密には解かれていない。即ち、Heisenberg model では、各次元の各々の lattice type に対して、相転移が起るか、起らないかという問題は、今だに正確には、わかっていない。勿論、いろいろな近似的方法で、この問題が、議論されてきた。例えば、最も簡単な分子場近似では、全ての次元で相転移が起る事になる。Bloch[1] の Bose 統計を用いた Spin wave の議論では、一次元，二次元では、相転移は起らず、三次元でのみ起る事が示されている。一方、Mannari[2] の fermi 統計を用いた Spin wave の議論では、全ての次元で相転移が起る事になる。厳密に解かれている例としては、わずかに一次元 Heisenberg model の中の特殊な case (exchange interaction $J_Z = 0$) だけである。それは、Katsura[3]，Lieb, Schultz & Mattis[4] によって、Hamiltonian を creator, anihilater によって表わし、canonical 変換によって diagonalize する方法によって解かれた。この case では、相転移は起らない。その他の近似的解としては P.R. Weiss[5] の Bethe 近似によるものがある。これは一個の spin に着目し、その nearest の spin までは、interaction を厳密に取り入れ、その nearest spin に与える他の spin の影響は、self-consistent な effective field で置きかえる方法である。こうして、Bethe 近似では、有限個の spin 系の問題に reduce されるので、原理的には、必ず解ける。実際、Weiss は、linear chain, quadratic layer, simple cubic, hexagonal layer, body centered cubic に対して

全系の eigen value (energy level) と eigen function を計算し、それを使つて、Curie point T_C や比熱の jump 等を求めた。それによると、一次元，二次元では、相転移は起らず、三次元でのみ、相転移が起るという Bloch と同じ結果を得ている。これは、相当に面倒な計算である。もう少し簡単な粗い近似として、Oguchi[6] によつて、分子場理論の改良が行われている。即ち、二つ又は三つ並んだスピンを考え、その間の interaction は exact に扱い、それに与える他のスピンの影響は、平均的分子場で置きかえる方法である。この方法は、近似を上げて、三つ以上並んだスピンを扱う時には self-consistent でなくなるという欠点がある。これによると、全ての次元で、相転移が起る事になり、その点では、第0近似の分子場理論と本質的には同じである。又、Kasteleijn と van Kranendonk[7] は、最隣接スピン対の Hamiltonian の Zeeman term の係数を変分 parameter にして、それをもとに、結晶全体の Free energy を求め、それを変分して、T_C を求めている。この方法もかなり複雑であるが、それによると一次元と二次元正方格子では、相転移は起らず、二次元三角格子と、三次元で、相転移が起る。この constant coupling 近似を改良した結果によると、二次元三角格子と単純立方格子は、区別がついて、前者では、相転移が起らない。（小口；39年物性夏の学校テキスト）又、Kubo, Obata, Ono[8] は、密度行列を展開定理[9] を用いて、$1/T$ の代りに、short range order をある程度繰り込んだ別のうまい parameter で、状態和を展開し、最初の数項を求め、それから、帯磁率 χ を、同じく級数の型で、求め、その発散点として、Curie 点 T_C を出している。それによると、一次元では、相転移は起らず、三次元では、相転移が起り、その T_C は、Weiss による Bethe－近似の結果と極めて近い値を得ている。二次元の場合は、収斂が悪くて、あまり確定的な事は言えないようである。

さて、ここで、今まで、多くの人によつて、議論されて来た問題を敢えて、再び取り上げる目的は、一つには、最近二次の相転移の転移点近傍の singularity の様子が、いろいろ議論されており[10),11),12)] 特に、Spin 系では、高温展開，低温展開によつて、帯磁率，比熱，自発磁化等が、調べられている。その中でも、Ising model では、一次元，二次元の場合は、exact に解かれており[13)] 三次元の場合は、級数展開によつて、相当高い巾のところまで求め

られて、それをもとにPadéの方法で、転移点近傍のsingularityの様子がかなり良くわかつてきた。しかし、Heisenberg modelでは、たとえ、級数展開によつて、議論しても、quantum mechanicalに計算しなければならないので、非常に面倒で、まだ最初の数項しか求められておらず、それをもとにしたPadéによる結果もIsingの場合よりは、ずつと、信頼度が薄い。
そこで、Heisenberg modelのessentialな点を残し、しかも、取り扱いがIsing modelと同程度に容易なmodelで、T_cの近く、上・下を含めて、それ以上高温のところも議論できるmodelをここに提案したい。

§2. A model density matrix

まず、簡単の為に、磁場が無い場合を考える事にする。更にspin $s = 1/2$とする。（一般の場合も、少し複雑になるが、同様に議論出来る！）
Hamiltonianは

$$\mathcal{H}_0 = -J \sum_{\mathrm{pair}(i>j)} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \ , \tag{1}$$

density matrix ρは、

$$\boxed{\rho = \exp(K \sum_{\mathrm{pair}} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) \ , \quad K = J/kT \ ,} \tag{2}$$

ここで、一般に、$(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)$と$(\mathbf{S}_e \cdot \mathbf{S}_m)$とは、suffixに同じsiteのものがあれば、commuteしないから、(2)のexponentialをそれぞれの積の形にする事は出来ないのであるが、(2)のρの代りに、modelとして、

$$\rho_s = \{ \prod_{\mathrm{pair}} \exp(K\, \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) \}_{\mathrm{sym}} \tag{3}$$

を用いたらどうなるだろうか。一見これは非常に悪い事をしているように見えるが、実際は、絶対零度の近くを除けば、（転移点の近傍上・下を含めて）、Heisenberg modelの特長を充分に残し、定量的にも、相当に良く一致した結果を与えるmodel density matrixである事を主張したい。その事を具体的なT_cの計算によつて示してみよう。

まず、(3)のspinは、symmetrized productを作ることを意味する。
(3)のρ_sが、どのような近似になつているかを一般的に、議論するには、Kubo

の密度行列の展開定理を用いればよいであろう。[9] ρ_S は展開公式の第一項になつている。しかし、第二項以下を具体的に調べるのは、相当大変な事になる。

さて、ρ_S は、もつとずつと簡単な式に reduce 出来る。まず、容易に次式が示される。

$$(\mathbf{S}_i\cdot\mathbf{S}_j)^2 = 3 - 2(\mathbf{S}_i\cdot\mathbf{S}_j) \tag{4}$$

即ち、$(\mathbf{S}_i\cdot\mathbf{S}_j)$ の eigen value は +1 , −3 である。但し、Spin operator $\mathbf{S}$ は $S_x^2 = 1$ に規格化したものを用いた。これより、容易に、次式が導かれる。[8]

$$\exp(K\,\mathbf{S}_i\cdot\mathbf{S}_j) = a(K) + b(K)(\mathbf{S}_i\cdot\mathbf{S}_j) \tag{5}$$

但し

$$\left\{\begin{aligned} a(K) &= e^{-K}(\cosh 2K + \frac{1}{2}\sinh 2K) \\ b(K) &= \frac{1}{2}\,e^{-K}\sinh 2K \end{aligned}\right. \tag{6}$$

更に、後の便宜上、次の x を定義しよう。

$$x = \frac{b(K)}{a(K)} = \frac{\tanh 2K}{2 + \tanh 2K} \tag{7}$$

これは、前に、Kubo, Obata, Ono によつて導入された parameter と本質的に同じである。（4だけ factor が異なる！）(5)より(3)は、

$$\boxed{\rho_S = a^{N_p} \prod_{pair} \mathrm{sym}(1 + x\,\mathbf{S}_i\cdot\mathbf{S}_j)} \tag{8}$$

と表わされる。N_p は pair の数を表わす。(8)の形にしてみると、これは Ising model の場合と非常に似ている事がわかる。即ち、この model は、数学的な取扱いが Ising model に近くなつているので、厳密に解ける望みもあり、T_c ばかりでなく、転移近傍の singularity の様子を調べるのにも有効であると思われる。しかし、勿論 ρ_S から状態和を求めるには、Trace をとつて、quantum mechanical な計算をしなければならないから、Ising model よりは、複雑である。

§ 3. A model density matrix と相転移

—— Bethe 近似による Curie 点の決定——

Heisenberg model に Bethe 近似を適用して、T_C を決める話は、P.R. Weiss が既にやつているのだが、ここで改めて model density matrix ρ_S に全く同じ Bethe 近似を適用して、T_C を決め、Weiss の結果と比較してみよう。

良く知られているように、Bethe 近似の精神は、一つのスピン $\mathbf{S}_0$ と、その周囲の z 個のスピン $\mathbf{S}_1$, $\mathbf{S}_2$, … $\mathbf{S}_Z$ をとり、$\mathbf{S}_0$ と $\mathbf{S}_1$, $\mathbf{S}_2$, …$\mathbf{S}_Z$ との相互作用は厳密にとり入れ、その他の原子からの影響は、$\mathbf{S}_1$,…$\mathbf{S}_Z$ に対するある分子場 H' として考える。分子場 H' は、S_0^Z の平均 $\langle S_0^Z \rangle$ と S_j^Z の平均 $\langle S_j^Z \rangle$ が同一であるという条件から定める。外場 H = 0 の時、trivial な解 $\langle S_0^Z \rangle = 0$ の他に nontrivial な解 $\langle S_0^Z \rangle \neq 0$ が存在する条件から、Curie 点 T_C を決定する。即ち自発磁化が、出来始める温度として決める。

さて、z + 1 個の partition function Z は (no field H=0 の場合) 新しい立場では、

$$Z = \mathrm{Tr}\left[\left(\prod_{i=1} e^{K(\mathbf{S}_0\cdot\mathbf{S}_i)}\right)_{sym}\cdot \prod_{i=1}^{Z} e^{h' S_i^Z}\right] \tag{9}$$

ここで

$$h' = \mu_0 H' / kT$$

この場合、容易にわかるように、問題の系の対称性から、sym の操作は不要で、勝手な順序の product を一つ作ればよい。そこで(9)は、

$$Z = (ac)^Z \,\mathrm{Tr} \prod_{i=1}^{Z}(1+x\,\mathbf{S}_0\cdot\mathbf{S}_i)\prod_{i=1}^{Z}(1+y\,S_i^Z) \tag{10}$$

但し　$c = \cosh h'$　,　$y = \tanh h'$　(11)

又

$$\langle S_0^Z \rangle = \frac{(ac)^Z}{Z}\mathrm{Tr}\, S_0^Z \prod_{i=1}^{Z}(1+x\,\mathbf{S}_0\cdot\mathbf{S}_i)\prod_{i=1}^{Z}(1+y\,S_i^Z) \tag{12}$$

$$\langle S_1^Z \rangle = \frac{(ac)^Z}{Z}\mathrm{Tr}\, S_1^Z \,\pi(1+x\,\mathbf{S}_0\cdot\mathbf{S}_i)\,\pi(1+y\,S_i^Z) \tag{13}$$

今、便宜上、次の記号を導入しよう。

$$\langle\!\langle A \rangle\!\rangle \equiv \mathrm{Tr}\, A \pi (1 + x\, \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_i)\, \pi (1 + y S_i^z) \tag{14}$$

さて、上にも議論したように、Curie 点 T_c を定めるには

$$\langle\!\langle S_0^z \rangle\!\rangle = \langle\!\langle S_1^z \rangle\!\rangle \tag{15}$$

が、$y=0$ ($H'=0$) の解の他に、$y \fallingdotseq 0$ ($H'=0$) なる解を持ち始める条件を調べればよい。それには、(15)の両辺をyの一次まで求めて、yで両辺を割れば、T_c を決定する式になる。$\langle\!\langle S_0^z \rangle\!\rangle$，$\langle\!\langle S_1^z \rangle\!\rangle$ をyの多項式として、厳密に求めることは容易に出来るが、今必要な一次までの項を書くと、

$$\begin{aligned}
\langle\!\langle S_0^z \rangle\!\rangle &= \mathrm{Tr}\, S_0^z \overset{z}{\underset{i=1}{\pi}} (1 + x \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_i) + \\
&\qquad + \mathrm{Tr}\, S_0^z \overset{z}{\underset{i=1}{\pi}} (1 + x \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_i) \sum_{i=1}^{z} y S_i^z + 0(y^3) \\
&= z x y\, \mathrm{Tr}\, S_0^z (\mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_1) S_1^z = z x y \cdot \mathrm{Tr}\, 1 + 0(y^3)
\end{aligned} \tag{16}$$

$$\begin{aligned}
\langle\!\langle S_1^z \rangle\!\rangle &= \mathrm{Tr}\, S_1^z \overset{z}{\underset{i=1}{\pi}} (1 + x \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_i) + \\
&\qquad + \mathrm{Tr}\, S_1^z \overset{z}{\underset{i=1}{\pi}} (1 + x \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_i) \sum_{i=1}^{z} y S_i^z + 0(y^3) \\
&= \mathrm{Tr}\, S_1^z \cdot (y S_1^z) + (z-1)\, \mathrm{Tr} S_1^z (x \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_1)(x \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_2)(y S_2^z) \\
&= \{ y + (z-1) x^2 y \}\, \mathrm{Tr} I + 0(y^3)
\end{aligned} \tag{17}$$

但し　$\mathrm{Tr}\, S_0^z (\mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_1) = 0$ ，$\mathrm{Tr}\, S_1^z (\mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_1) = 0$ ，

$\mathrm{Tr}\, S_0^z (\mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_1)(\mathbf{S} \cdot \mathbf{S}_2) = 0$ ，$\mathrm{Tr}\, S_0^z (\mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_1) S_2^z = 0$ etc.

を用いた。

そこで、(15)より、

$$z x y + 0(y^3) = \{ 1 + (z-1) x^2 \} y + 0(y^3)$$

yで割つて、$y=0$ とおくと、$x_c = x(K_c)$ は、

$$(z-1)x_c^2 - zx_c + 1 = 0$$

$$\therefore \quad x_c = 1 \quad , \quad \frac{1}{z-1}$$

一方、$x = \tanh 2K/(2+\tanh 2K) < 1$, $(K>0)$

$$\therefore \quad x_c = \frac{1}{z-1} \text{ (} x_c \text{ が存在するなら。)}$$

$$\therefore \quad \boxed{\tanh 2K_c = \frac{2}{z-2}} \qquad (K_c = J/kT_c) \tag{18}$$

これが、model density matrix の Bethe 近似による T_c の公式である。これより、

$$\left\{\begin{array}{lll} Z \leq 4 & \cdots\cdots\cdots\cdots & \text{Non ferromagnetic} \\ z > 4 & \cdots\cdots\cdots\cdots & \text{Ferromagnetic} \end{array}\right. \tag{19}$$

依つて、一次元，二次元（正方格子）では、相転移は起らず、三次元（z＝6；simple cubic，z＝8；body center cubic）では相転移が起る。これはP.R. Weiss の結果と一致している。更に、三次元の場合、(18)より K_c を求めて、定量的に比較してみよう。但し、Weiss の paper とはJの定義が2だけ異なるので、$2K_c$ で比較しよう。参考の為に、他のいろいろな方法で計算されたものも合せて表にすると次のようになる。

表1（$2K_c$ の値）

方　法（auther）	一次元	二次元 正方	二次元 三角	単純立方	体心立方	面心立方
分子場第2近似[6)]	1.923	0.578	0.350	0.356	0.259	0.171
Heisenberg App. I	1.00	0.500	0.333	0.333	0.250	
Heisenberg App. II	None	None	None	None	0.500	
Constant coupling （第0近似）[7)]	None	None	0.549	0.549	0.346	0.203
〃 （第1近似）（Oguchi）	None	None	None	0.546	0.345	0.231

Kubo, Obata Ono[8]	None			0.541	0.345	0.222
P.R. Weiss (Bethe 近似)[5]	None	None	None	0.540	0.3445	
present theory	None	None	None	0.549	0.346	

上の表を見て、気が付く事は、新しい結果とP.R. Weiss の結果とが、定量的にも、大変良く一致している事である。この事は、model density matrix が、Heisenberg interaction の本質を定量的にも、相当良く表わしていることを示すものと思われる。実は T_C を与える (18) の公式は constant coupling 近似による解と全く一致している。しかし、二次元三角格子や面心立方格子では、違いが現れる。実際、これらの格子では、model density matrix を使つてBethe 近似で解く時、nearest spin 間の相互作用も同時に考慮しなければならないので、改めて独立に計算しなければならない。二次元三角格子で、計算してみると、紙面の都合で、途中は省略するが、同様な計算の結果、相転移は起らない。もともとの constant coupling 近似では、二次元三角格子と、単純立方格子では、区別がつかず、前者でも相転移が起ることになつてしまう。

§ 4. 自発磁化と比熱の jump

Curie 点の近傍で、自発磁化 M_S を求めるには、$\langle\langle S_0^Z \rangle\rangle$ と $\langle\langle S_1^Z \rangle\rangle$ を (16), (17)に於いて、次の項まで求めて、等置すればよい。即ち、

$$\langle\langle S_0^Z \rangle\rangle = \{ zxy + {}_zC_3 \,\mathrm{Tr}\, S_0^Z (xS_0^Z S_1^Z)(xS_0^Z S_2^Z)(xS_0^Z S_3^Z) \times$$

$$\times\, y^3 S_1^Z S_2^Z S_3^Z \} \,\mathrm{Tr}\, 1 + 0(y^5)$$

$$= (zxy + {}_zC_3\, x^3 y^3)\,\mathrm{Tr}\, 1 + 0(y^5)$$

$$\langle\langle S_1^Z \rangle\rangle = \{ y + (z-1)\, x^2 y + {}_{z-1}C_2 \,\mathrm{Tr}\, S_1^Z (xS_0^Z S_2^Z)(xS_0^Z S_3^Z) \times$$

$$\times\, y^3 S_1^Z S_2^Z S_3^Z + {}_{z-1}C_3 \,\mathrm{Tr}\, S_1^Z (xS_0^Z S_1^Z)(xS_0^Z S_2^Z)(xS_0^Z S_3^Z) \times$$

$$\times\, (xS_0^Z S_4^Z) y^3 S_1^Z S_2^Z S_3^Z \} \,\mathrm{Tr}\, 1 + 0(y^5)$$

$$= \{ y + (z-1) x^2 y + {}_{z-1}C_2 x^2 y^2 + {}_{z-1}C_3 x^4 y^3 \} \mathrm{Tr}\, 1 + 0(y^5)$$

故に、$\langle\!\langle S_0^Z \rangle\!\rangle = \langle\!\langle S_1^Z \rangle\!\rangle$ よりnon-trivial な解として、

$$y^2 = \frac{3(z-1)^3 (x-x_C)}{z(z-2)} + 0\{(x-x_C)^2\} \tag{20}$$

自発磁化 M_S は、

$$M_S = N\mu_0 \langle S_0^Z \rangle = N\mu_0 z x y + 0(y^3)$$

$$\therefore M_S = N\mu_0 \sqrt{\frac{3z^2(z-4)K_C}{(z-1)(z-2)}} \times \sqrt{1 - \frac{T}{T_C}} + 0\,(\text{higher}) \tag{21}$$

次に、Curie 点に於ける比熱のjump ΔC を求めてみよう。スピン一個当りのenergy E は、

$$E = \frac{z}{2}(-J \langle \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_1 \rangle) \tag{22}$$

ここで

$$\langle \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_1 \rangle = \begin{cases} 3\langle S_0^Z S_1^Z \rangle & \cdots\cdots \ T \geqq T_C \\ \langle S_0^Z S_1^Z \rangle + 2\langle S_0^X S_1^X \rangle & \cdots \ T \leqq T_C \end{cases} \tag{23}$$

比熱Cは、 $C = \dfrac{dE}{dT} = -\dfrac{J}{kT^2}\dfrac{dE}{dK}$

$$\therefore \frac{C}{k} = \begin{cases} \dfrac{3z}{2}K^2 \dfrac{d}{dK}\langle S_0^Z S_1^Z \rangle & \cdots \ T \geqq T_C \\ \dfrac{z}{2}K^2 \dfrac{d}{dK}(\langle S_0^Z S_1^Z \rangle + 2\langle S_0^X S_1^X \rangle) & \cdots \ T \leqq T_C \end{cases} \tag{24}$$

さて、$\langle S_0^Z S_1^Z \rangle\!\rangle = \langle\!\langle S_0^Z S_1^Z \rangle\!\rangle / \langle\!\langle 1 \rangle\!\rangle$

$$\langle\!\langle S_0^Z S_1^Z \rangle\!\rangle = \mathrm{Tr}\, S_0^Z S_1^Z \prod_{i=1}^{Z}(1 + x\mathbf{S}_0\mathbf{S}_i) \prod_{i=1}^{Z}(1 + yS_i^Z)$$

比熱のjump を議論するには、$(T_C - T)$ の一次，即ちy^2 の項まで求めればよいから、

$$\prod_{i=1}^{z}(1+yS_i^z)=1+y\sum_{i=1}^{z}S_i^z+y^2\sum_{i>j}^{z}S_i^zS_j^z+0(y^3) \tag{26}$$

故に

$$\ll S_0^zS_1^z\gg=\mathrm{Tr}\,S_0^zS_1^z\prod_{i=1}^{z}(1+x\mathbf{S}_0\cdot\mathbf{S}_i)+$$

$$+y^2\mathrm{Tr}\,S_0^zS_1^z\prod_i(1+x\mathbf{S}_0\mathbf{S}_i)\Sigma S_i^zS_j^z+0(y^3)$$

$$=\mathrm{Tr}\,S_0^zS_1^z(xS_0^zS_1^z)+y^2\{\mathrm{Tr}\,S_0^zS_1^z\sum_{i=2}^{z}(xS_0^zS_i^z)S_1^zS_i^z+$$

$$+\mathrm{Tr}\,S_0^zS_1^z\sum_{i>j\neq1}^{z}(xS_0^zS_1^z)(xS_0^zS_i^z)(xS_0^zS_j^z)S_i^zS_j^z$$

$$=\{x+xy^2(z-1)\{1+\frac{z-2}{2}x^2\}\,\mathrm{Tr}\,1 \tag{27}$$

i) $T\geqq T_c$ では、$y\equiv0$，　故に

$$\ll S_0^zS_1^z\gg=x\,\mathrm{Tr}\,1\quad,\qquad\ll1\gg=\mathrm{Tr}\,1$$

$$\therefore\quad<S_0^zS_1^z>=x(K)\equiv\tan 2K/(2+\tanh 2K)\;,$$

故に、x は物理的には、short-range order を表わしている。

$$\therefore\quad\frac{C_+}{k}\equiv\frac{C}{k}(T\to T_c+0)=\frac{3zK_c^2}{2}\left(\frac{dx}{dK}\right)_{T_c}=\frac{3(2K_c)^2}{8}\cdot\frac{z^2(z-4)}{(z-1)^2} \tag{28}$$

ii) 低温側の比熱 C_- について。

(27) の $\ll S_0^zS_1^z\gg$ の他に、$\ll S_0^xS_1^x\gg$ を計算しなければならない。y^2まで求める。

$$\ll S_0^xS_1^x\gg=\mathrm{Tr}\,S_0^xS_1^x(x\mathbf{S}_0\mathbf{S}_1)+y^2\{\mathrm{Tr}\,S_0^xS_1^x\sum_{i=2}^{z}(x\mathbf{S}_0\cdot\mathbf{S}_i)S_1^zS_i^z+$$

$$+\mathrm{Tr}(S_0^xS_1^x)\sum_{i>j>1}^{z}(xS_0^xS_1^x)(xS_0^zS_1^z)(xS_0^zS_j^z)S_i^zS_j^z+$$

$$+\mathrm{Tr}(S_0^xS_1^x)\sum_{j>1}^{z}(xS_0^yS_1^y)(xS_0^zS_j^z)(S_1^zS_j^z)\}$$

$$=\{x-y^2(z-1)x^2(1+\frac{z-2}{2}x)\}\,\mathrm{Tr}\,1+0(y^4) \tag{29}$$

一方 $\langle S_0 S_1\rangle = \langle\langle S_0 \cdot S_1\rangle\rangle / \langle\langle 1\rangle\rangle$ で

$$\langle\langle 1\rangle\rangle = \mathrm{Tr}\,1 + \mathrm{Tr}\,\pi\,(1 + x\mathbf{S}_0\mathbf{S}_1)\,y^2 \sum_{i>j} S_i^z S_j^z + 0\,(y^4)$$

$$= 1 + \frac{z(z-1)}{2} x^2 y^2 \}\,\mathrm{Tr}\,1 + 0\,(y^2)$$

$$\therefore \quad \langle S_0 S_1\rangle = 3x + y^2(z-1)x(1-2x-3x^2) + 0(y^4)$$

$$= 3x + \frac{3(z-1)(z-4)}{z-2} \times (x - x_C) + 0((K-K_C)^2) \tag{30}$$

$$\therefore \quad \frac{C_-}{k} = \frac{1}{k} C(T \to T_C - 0) = \frac{3zK_C^2}{2} \{ 1 + \frac{(z-1)(z-4)}{z-2} \} \left(\frac{dx}{dK}\right)_C \tag{31}$$

故に、比熱の jump ΔC は、

$$\boxed{\frac{\Delta C}{k} = \frac{C_-}{k} - \frac{C_+}{k} = \frac{3(2K_C)^2}{8} \times \frac{z^2(z-4)^2}{(z-1)(z-2)}} \tag{32}$$

これも、constant coupling 近似の結果と完全に一致する。S.C. と b,c,c に対して、値を求めてみると、

$$z = 6 \cdots \Delta c/k = 0.813 \ , \quad z = 8 \cdots \Delta c/k = 1.06 \tag{33}$$

これは、Weiss の値 ($\Delta c/k = 2.05 \cdots z = 8$) とは、全然異なるが、Kasteleijn[7]達によつても指摘されているように、Weiss の計算に誤りがあるからである。（比熱の部分のみ！）

§ 5. 一次元の厳密解 (for ρ_S)

今まで議論して来た model density matrix は、もとの Heisenberg model に較べると、ずつと取り扱い易いものになつているが、それでも pair interaction を通じて、遠くのスピン間の correlation も、ある意味で全部入つており、いろいろな cluster の和から成り立つているので、一般の次元の格子では、厳密に求めるのは Ising model と同程度に、或いは、それ

以上に困難である。それで、前の章まででは、Bethe 近似を使つて議論して、T_C 等を定め、もとのHeisenberg model を同じ近似方法で解いてたものと極めて良く一致することを示した。しかし、これはBethe 近似の特殊性によつて、両者のmodel の違いがmask されてしまつて、plausible な結果になつたのではないか、他の近似方法で同時に両者の解を求めて、比較したら大きな違いが出て来るのではないかというような懸念が持たれる。そこで、これに直接的に答える為には、もとのHeisenberg model と、新しいmodel density matrix の両者で、共に厳密に解ける場合を詳しく調べてみるのは、大変意義のあることだと思う。現在、Heisenberg model で厳密に解かれているのは、一次元のanisotropic な場合だけである。[3),4)] そこで、これに対応するmodel density matrix の厳密解を求めてみよう。

i) $J_x = J_y = J$, $J_z = 0$, no field の case。

model density matrix は、

$$\rho_S = \prod_{i=1}^{N} \mathrm{sym}\, \exp\{K(S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y)\} \tag{34}$$

$$(S_{N+1}^{x,y} \equiv S_1^{x,y} \text{ とする ; ring model })$$

今 $$A_{i,i+1} = S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y \tag{35}$$

とおくと、容易に次のような公式が示せる。

〔公式 1〕

$$A_{i,i+1}^2 = 2 - 2 S_i^z S_{i+1}^z \tag{36}$$

〔公式 2〕

$$A_{i,i+1}^3 = 4 A_{i,i+1} \tag{37}$$

故に、$A_{i,i+1}$ の eigen value は 0 , +1 , −2 である。

〔公式 3〕（公式 2 を一般化して）（suffix は省略して）

$$A^{2n+1} = 4^n \cdot A \ , \ A^{2n} = 4^{n-1} \cdot A^2 \ (n \geqq 1) \tag{38}$$

〔公式 4〕（公式 3 を用いて示せる。）

$$\underline{\exp(KA) = 1 + a(K)\,A + b(K)\,A^2} \tag{39}$$

$$\left\{\begin{array}{l} a = a(K) = (\sinh 2K)/2 = \sinh K \cosh K \\ b = b(K) = (\cosh 2K - 1)/4 = (\sinh^2 K)/2 \end{array}\right. \tag{40}$$

依つて

$$Z_N = \mathrm{Tr}\,\rho_s = \mathrm{Tr}\prod_{i=1}^{N}\mathrm{sym}(1 + aA_{i,i+1} + bA_{i,i+1}^2) \tag{41}$$

更に、linear chain の場合は、次の公式を総合することによつて、(41)の symmetrized product は、実は、勝手な順序の product を一つ作つて Trace をとればよいことが、容易にわかる。

〔公式5〕 ($A_i \equiv A_{i,i+1}$ と略記して)

$$[A_i, A_{i+1}] = i(S_i^x S_{i+1}^z S_{i+2}^y - S_i^y S_{i+1}^z S_{i+2}^x)$$

故に、$g(A) \equiv \{A_i, A_{i+1}$ を含まぬ $\{A_l\}$の任意の関数として$\}$

〔公式6〕

$$\mathrm{Tr}\, g(A) A_i A_{i+1} = \mathrm{Tr}\, g(A) A_{i+1} A_i \tag{42}$$

(注) A_i, A_{i+1} と $g(A)$は必ずしも Commute しない。

〔公式7〕

$$[A_i, A_{i+1}^2] = 4i(S_i^x S_{i+1}^y S_{i+2}^z - S_i^y S_{i+1}^x S_{i+2}^z)$$

〔公式8〕 (公式7を用いて)

$$\mathrm{Tr}\, g(A) A_i A_{i+1}^2 = \mathrm{Tr}\, g(A) A_{i+1}^2 A_i \tag{43}$$

これらの公式を総合して、(41)の sym はとることが出来て、結局簡単に次のようになる。

$$\underline{Z_N = \mathrm{Tr}\prod_{i=1}^{N}(1 + aA_i + bA_i^2)} \tag{44}$$

公式1を用いて

$$Z_N = \mathrm{Tr}\prod_{i=1}^{N}(1 + 2b)(1 + \alpha A_i + \beta S_i^z S_{i+1}^z) \tag{45}$$

$$\alpha = a/(1+2b) = \tanh K, \qquad \beta = -2b/(1+2b) = -\tanh^2 K,$$

$\{A_i\}$ と $\{S_i^z S_{i+1}^z\}$ の mixed product の Trace は零になるから、結局

$$Z_N = 2^N(1+2b)^N(1+\alpha^N+\beta^N)$$

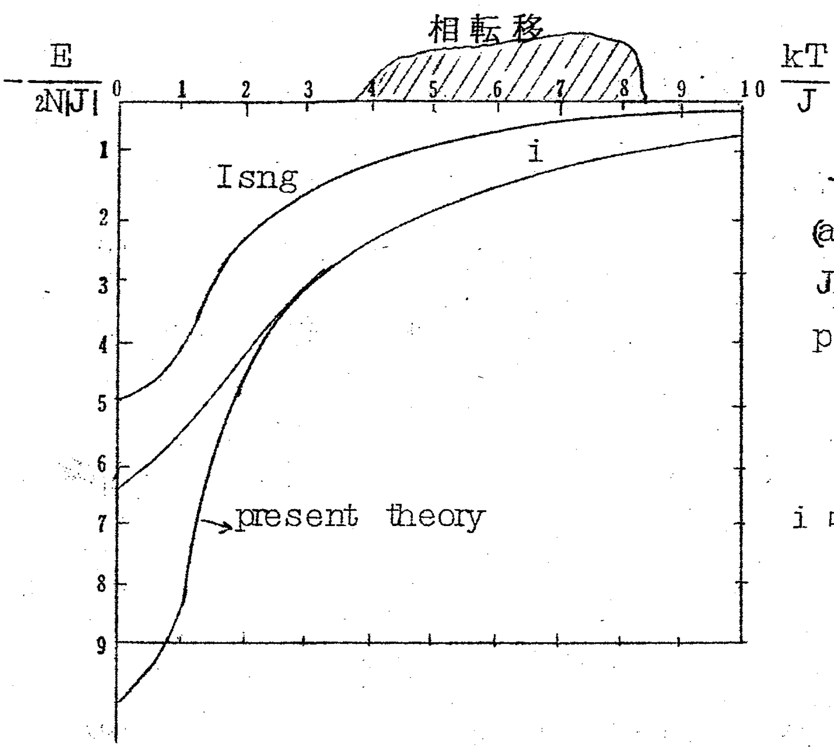
$|\alpha|<1$, $|\beta|<1$ より

$$Z = \lim_{N\to\infty} Z_N^{\frac{1}{N}} = 2(1+2b) = \underline{2\cosh^2 K} \tag{46}$$

故に energy E は、

$$\underline{E = -J\frac{d}{dK}\log Z = -2J\tanh K} \tag{47}$$

これは、Ising model の energy の丁度2倍になつている。x , y 成分があたかも独立に energy に寄与するかのようになつている。これは、anisotropic な model density matrix の特長である。isotropic な場合には、少し違いが出る。さて、上に求めた energy E を Heisenberg model の exact solution と比較してみると、下図のようになる。



一次元Heisenberg
(anisotropic case;
$J_x=J_y=J$, $J_z=0$)
present theory では

$$E = -2J\tanh K$$

i 中間の cubve; exact
(Katsura)

この図から、$kT/J \equiv (1/K)$ が3又は4以上では、二つの model が極めて良く一致していることがわかる。一般に相転移の起る温度 Tc は $kT_c/J \sim 4\sim$

8に対応する。このことから、新しいmodel は、相転移の近くでは、大変良いmodel になつていると思われる。

ii) isotropic case (一次元)

この場合は、非常に簡単で容易に

$$Z_N = \pi_{sym} a(1 + x\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}) = (2a)^N (1 + 3x^N)$$

$$\therefore \quad Z = 2a = e^{-K}(2\cosh 2K + \sinh 2K) \tag{48}$$

energy E は

$$E = -J \times \frac{3\tanh 2K}{2 + \tanh 2K} \tag{49}$$

model density matrix は、絶対零度近くが一番もとのHeisenberg model から、はずれるはずだから、そこで両者を比較してみると

$$\frac{E(T=0)}{2|J|} \left\{ \begin{array}{ll} = -1.5000 \cdots\cdots & \text{present model} \\ = -0.8863 \cdots\cdots & \text{exact} \end{array} \right.$$

($J<0$; antiferromagnetic case) (Hulthen[14])

$T=0$ では、5割程度低くなり過ぎる。これは当然予構される order である。$T \neq 0$ では、Heisenberg model はこの場合、解かれていないので、比較出来ないが、anisotropic case の程度に (49)式が、真の値を反映しているであろう。

§ 6. Discussion

以上で、Heisenberg model の高温領域で、特に二次相転移の転移点近傍上・下を含めて、その特徴を充分生かし、定量的にも、相当良いmodel として symmetrized pair product density matrix が、有望であることを具体例で示した。今後このmodel で、いろいろなことが議論出来る。ここには、紙面が足りないので省略するが、やりかけている問題としては

1) Bethe 近似による帯磁率の計算

2) Anti-feromagnetic case (の Curie 点，その他)

3) 二次元，三次元model の厳密解(すでに解けている部分もある！)

4) parameter xによる展開係数 (Ising model を修正して容易に求まりそうである。) と Padé 近似による χ, M_S, C(比熱) の singularity の様子を調べる。

5) higher Spin の場合の議論。

6) critical scattering の theory 。

これらの結果は、次の機会にdiscuss したいと思う。最後にconjecture として、三次元で ρ_S を用いて χ の $\frac{4}{3}$ 乗法則，M_S の $\frac{1}{3}$ 乗則，比熱の log 発散等が証明出来ると期待される。相転移の本質であるところの long-range, short-range の correlation が、ある意味で、全部exact な pair interaction を通じて、ρ_S の中に入っているからである。

最後に、絶えず御指導下さる久保先生に深く感謝致します。又、有益な discussion をして下さつた久保研の皆様，物性研や京大の先生方に感謝致します。

References

1) F. Bloch, Z. Physik. 61 (1930), 206.
2) I. Mannari, Prog. Theor. Phys. 19 (1958), 201.
3) S. Katsura, Phys. Rev. 127 (1962), 1508.
4) E. Lieb, T. Schultz, D. Mattis, Ann, Phys. 16 (1961), 407.
5) P.R. Weiss, Phys. Rev. 74 (1948), 1493.
6) T. Oguchi, Prog. Theor. Phys. 13 (1955), 148.
7) J. Van Kranendonk and P.W. Kasteleijn, Physica 22 (1956) 317.
8) R. Kubo, Y. Obata, A. Ohno, Busseiron Kenkyu 43 (1951) 22; 57 (1952), 45.
9) R. Kubo, J. Chem. Phys. 20 (1952), 770.
10) M.E. Fisher, J. Math. Phys. 5 (1964), 944.
11) M. Sszuki, Bussei Kenkyu 3 (1965), 317.
12) M. Suzuki, Bussei Kenkyu 4 (1965), 1.
13) C. Domb, Advance in Phys. 9 (1960), 149.
14) L. Hulthén, Arkiv Mat, Astron. Fysik 26A, (1938), 1.